

УДК 538.9

АНАЛИЗ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВОДОРОДА С ВАКАНСИЯМИ В ОКТАЭДРИЧЕСКИХ И ТЕТРАЭДРИЧЕСКИХ ПОРАХ

Зюзин Денис Игоревич¹, аспирант гр.0ФКС-31,3 курс
Маркидонов Артем Владимирович², доктор физико-математических
наук, профессор

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего профессионального образования «Алтайский
государственный технический университет им. И.И. Ползунова», Барнаул,
Россия;

²Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего профессионального образования «Кузбасский
гуманитарно-педагогический институт КемГУ, Новокузнецк, Россия»

Аннотация. В настоящей работе представлены результаты изучения взаимодействия примесных атомов водорода с вакансией в ГЦК-решетках никеля, алюминия и интерметаллида Ni_3Al . Исследование проводилось с помощью компьютерного моделирования и методами молекулярной динамики с применением потенциала межатомного взаимодействия EAM с использованием специализированного программного обеспечения XMD. Исследовано изменение энергии связи атомов водорода с вакансиями в трёх материалах с двумя типами междоузлий – октаэдрические и тетраэдрические поры, с применением широкого диапазона концентраций водорода (от 1 до 50 атомов на расчётную ячейку). Полученные результаты важны для понимания процессов водородной деградации в этих материалах.

Ключевые слова: водородная деградация, ГЦК-решетка, вакансия, энергия связывания, молекулярная статика, упругая деформация.

Введение

Примесные атомы водорода, проникая в металлы и сплавы, способны оказывать влияние на их механические и физико-химические свойства, вызывая водородное охрупчивание, что в свою очередь ускоряет процесс разрушения материалов [1]. В структуре металлов и сплавов водород в кристаллической решетке взаимодействует с имеющимися точечными дефектами, что приводит к образованию стабильных комплексов, их миграции, а также к образованию трещин. Характерным механизмом взаимодействия примесных атомов водорода с точечными дефектами является взаимодействие с вакансиями. В процессе такого взаимодействия происходит образования комплексов «вакансия – водород», которые изменяют энергию образования вакансий, что сказывается на диффузионных процессах и накоплении внутренних повреждений.

В структуре ГЦК-решеток существует два основных вида междоузлий (пор), в которых могут располагаться атомы водорода – тетраэдрические и октаэдрические поры. Геометрия таких пор и их локальная электронная плотности, в связи с чем энергия связи водорода с вакансией могут различаться и будут зависеть от типа занимаемой поры.

В настоящей работе проведен сравнительный анализ изменения энергетических характеристик для трёх важных материалов с ГЦК-структурой: чистого никеля, алюминия и интерметаллида Ni_3Al . Выбор объектов обусловлен их широким применением в технике (Ni – основа жаропрочных сплавов, Al – лёгкие конструкционные материалы, Ni_3Al – интерметаллид с уникальными свойствами).

Таким образом, цель настоящей работы заключается в оценке энергии взаимодействия примесных атомов водорода с вакансиями в ГЦК-структуре представленных материалов в зависимости от концентрации водорода с помощью методов молекулярной динамики и компьютерного моделирования.

Методика расчета

Исследования проведены с помощью компьютерного моделирования методами молекулярной динамики с помощью программного обеспечения XMD и EAM-потенциалов, описывающих взаимодействие Ni-Ni , Al-Al , Ni-Al и Me-H .

Моделировалась расчетная ячейка никеля $10 \times 10 \times 10$ (рисунок 1) с периодическими граничными условиями. Межатомное взаимодействие описывалось с помощью потенциала EAM [2,3].

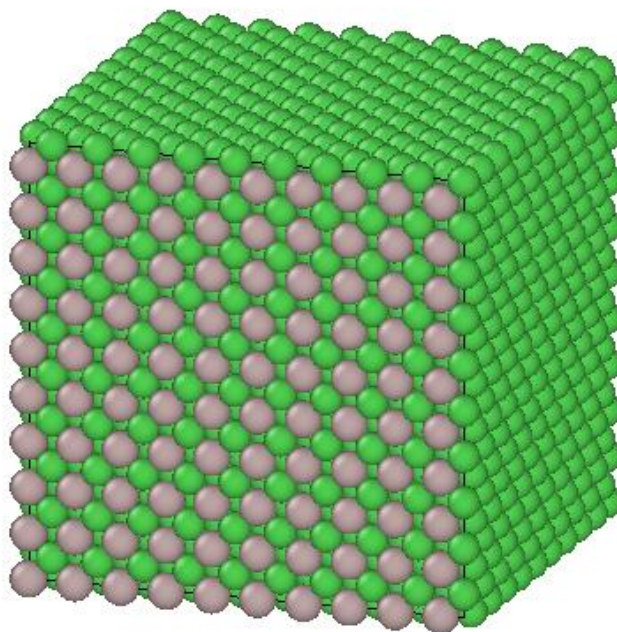


Рисунок 1 – Моделируемая ГЦК-решетка

Рассматривались две серии систем:

- идеальный кристалл (без вакансии) с различным числом атомов водорода (0, 1, 10, 20, 30, 40, 50), размещённых в октаэдрических или тетраэдрических порах;

- кристалл с одной вакансией и тем же количеством водорода.

Для каждой конфигурации проводилась статическая релаксация при температуре 0К. Полная потенциальная энергия системы (на атом) фиксировалась после достижения равновесия.

Результаты и обсуждение

1. Энергия связи одиночного атома водорода

Согласно представленной ранее методики были получены значения энергии связи для одного атома водорода при температуре 0К в двух представленных порах во всех трех материалах.

Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Энергия связи одного атома водорода с вакансией

Материал Количество атомов Н		Энергия связи, эВ	
		Октапора	Тетрапора
Ni	1	0,003	0,005
	10	0,044	0,051
	20	0,081	0,092
	30	0,118	0,133
	40	0,157	0,176
	50	0,201	0,221
Al	1	0,001	0,001
	10	0,012	0,012
	20	0,022	0,022
	30	0,033	0,033
	40	0,045	0,044
	50	0,058	0,056
Ni ₃ Al	1	0,002	0,002
	10	0,021	0,022
	20	0,039	0,042
	30	0,06	0,066
	40	0,083	0,093
	50	0,11	0,125

Энергия связи рассчитывалась по формуле:

$$E_{\text{св}} = (E_{\text{Вак}(1)} - E_{\text{Вак}(0)}) - (E_{\text{Идеал}(1)} - E_{\text{Идеал}(0)})$$

где

$E_{\text{Вак}(1)}$ – энергия ячейки с вакансией и 1 атомом водорода

$E_{\text{Вак}(0)}$ – энергия ячейки с вакансией без водорода;

$E_{\text{Идеал}(1)}$ – энергия идеальной ячейки (без вакансии) с 1 атомом водорода

$E_{\text{Идеал}(0)}$ – энергия идеальной ячейки без водорода.

Согласно полученным в ходе исследования данным, можно отметить следующие закономерности:

- Энергия связи монотонно возрастает с увеличением числа атомов водорода. Однако, энергия связи в алюминии ниже, чем в никеле. А энергия связи в Ni_3Al занимает промежуточное положение между Ni и Al . Это указывает на то, что при насыщении водородом вакансии в интерметаллиде становятся очень выгодной ловушкой.

- Энергия связи для тетрапор систематически выше, чем для октапор, что обусловлено тем, что атомы водорода предпочитают тетраэдрические позиции Ni при взаимодействии с вакансией, что согласуется с известными данными о предпочтительном расположении водорода в ГЦК-решётке Ni . Однако в алюминии тип междоузлия не оказывает существенного влияния на энергию связи водорода с вакансией. Для Ni_3Al при насыщении водородом тетраэдрические позиции становятся предпочтительнее.

Заключение

Согласно проведенному исследованию получилось определить четкую закономерность способности вакансии удерживать водород. Эта закономерность имеет снижение в ряду $\text{Ni} > \text{Ni}_3\text{Al} > \text{Al}$. Энергия связи водорода с вакансией существенно зависит от материала матрицы. Наибольшее предрасположенность к образованию комплексов «вакансия – водород» демонстрирует никель, наименьшее – алюминий. Интерметаллид Ni_3Al занимает промежуточное положение.

Тип междоузлия влияет на энергию связи и для большинства материалов выгодным расположением атомов водорода является тетраэдрическая пора.

Концентрационная зависимость показывает, что вакансии способна аккумулировать большое количество атомов водорода (не менее 50), причем энергия связи растет с увеличением числа атомов.

Список литературы

1. Fukai Y. The Metal-Hydrogen System. — Berlin: Springer, 2005. — 450 p.
2. Степанова, Л. В. Молекулярно-динамическое моделирование нагружения ультратонкой алюминиевой пластины на кремниевом основании / Л. В. Степанова, К. А. Мушанкова // Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия. — 2025. — Т. 31, № 3. — С. 141-155. — DOI 10.18287/2541-7525-2025-31-3-141-155. — EDN ICQZGB.
3. Baskes, M. I.; Angelo, J. E.; Moody, N. R. Atomistic Calculations of Hydrogen Interactions with Ni_3Al Grain Boundaries and $\text{Ni}/\text{Ni}_3\text{Al}$ Interfaces B: Hydrogen Effects in Materials: Proceedings of the Fifth International Conference.

Moran, WY, USA, 1994. Warrendale, PA: The Minerals, Metals & Materials Society (TMS), 1996, С. 77–90.

4. Зоря, И. В. Изучение причин агрегации примесных атомов водорода в металлах в молекулярно-динамических моделях / И. В. Зоря, Г. М. Полетаев, М. Д. Старостенков // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2018. – Т. 15, № 3. – С. 366-373. – DOI 10.25712/ASTU.1811-1416.2018.03.009. – EDN YBKJKN.

5. Компьютерное моделирование взаимодействия примесных атомов водорода с границами кручения в Ni и Pd / Г. М. Полетаев, И. В. Зоря, Е. С. Медведева [и др.] // Новые материалы и технологии : сборник научных статей IV Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции, Барнаул, 12–15 декабря 2016 года / Алтайский государственный университет. – Барнаул: ИГ "Си-пресс", 2016. – С. 4-9. – EDN YFZLOF.

6. L12-type Ni₃Al-based high-entropy aluminides with superior strength-ductility: From design to criteria / Zh. Liu, L. Zhang, P. Zhao, Ch. Wang // Intermetallics. – 2025. – Vol. 187. – P. 108979. – DOI 10.1016/j.intermet.2025.108979. – EDN FEQYYD.

7. Fukai Y. The Metal-Hydrogen System. — Berlin: Springer, 2005. — 450 p.

8. Zhao J., Zhang X., Li Y. Hydrogen embrittlement mechanisms in high-strength steels // Acta Materialia. — 2020. — Vol. 183. — P. 10–18.

9. Critical assessment of hydrogen pipe diffusion at dislocations in metals / X. Zhou, P. Ou, N. Mousseau, Ju. Song // Acta Materialia. – 2024. – Vol. 268. – P. 119758. – DOI 10.1016/j.actamat.2024.119758. – EDN HWRSXJ.

10. Kirchheim R. Reducing grain boundary, dislocation line and vacancy formation energies by solute segregation: I. Theoretical background // Acta Materialia. — 2007. — Vol. 55, No. 15. — P. 5129–5138.

11. Шалаев, А. А. Основы физического материаловедения : учебное пособие / А. А. Шалаев ; Иркутский государственный университет, Институт геохимии им. А. П. Виноградова Сибирского отделения Российской академии наук. – Иркутск : федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Иркутский государственный университет", 2013. – 159 с. – (Методы экспериментальной физики конденсированного состояния ; Часть 1). – EDN TKRZUX.

12. Зоря, И. В. Влияние упругой деформации кристаллической решетки ГЦК металлов на энергию связи и миграции примесных атомов легких элементов / И. В. Зоря, Г. М. Полетаев // Химическая физика и мезоскопия. – 2019. – Т. 21

13. Molecular dynamics simulation of hydrogen atom diffusion in crystal lattice of fcc metals / G. M. Poletaev, D. V. Novoselova, M. D. Starostenkov, I. V. Zorya // International Journal of Materials Research. – 2017. – Vol. 108, No. 10. – P. 785-790. – DOI 10.3139/146.111556. – EDN XOKKQY.

14. Callister, W. D., & Rethwisch, D. G. (2013). Fundamentals of Materials Science and Engineering: An Integrated Approach (4th ed.). John Wiley & Sons.
15. Fukai, Y. The Metal-Hydrogen System Basic Bulk Properties / Y. Fukai // Springer Series in Materials Science. – 2005. – Vol. 21. – P. 1-28. – DOI 10.1007/978-3-662-02801-8_1. – EDN KMHOFO.
16. Hydrogen Embrittlement Understood / Ia. M. Robertson, P. Sofronis, A. Nagao [et al.] // Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science. – 2015. – Vol. 46, No. 3. – P. 1085-1103. – DOI 10.1007/s11663-015-0325-y. – EDN DOMXPA.
17. Nagumo, M. (2004). Hydrogen related failure of steels – a new aspect. Materials Science and Technology, *20*(8), 940–950. DOI: 10.1179/026708304225019687
18. Kirchheim, R. (2007). Reducing grain boundary, dislocation line and vacancy formation energies by solute segregation: I. Theoretical background. Acta Materialia, *55*(15), 5129–5138. DOI: 10.1016/j.actamat.2007.05.047